

Lattice Boltzmann method for reactive thermal multicomponent flows

Doctoral Thesis**Author(s):**

Kang, Jinfen

Publication date:

2013

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-010112030>

Rights / license:

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

DISS. ETH NO. 21435

Lattice Boltzmann Method for Reactive Thermal Multicomponent Flows

A thesis submitted to attain the degree of
DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

JINFEN KANG

M. Eng., Dong-A University

born on *29.12.1982*

citizen of China

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Patrick Jenny, examiner

Prof. Dr. Sauro Succi, co-examiner

Dr. Nikolaos Prasianakis, co-examiner

PD. Dr. Ioannis Mantzaras, co-examiner

2013

Abstract

The lattice Boltzmann (LB) method is an emerging computational framework for simulating a multitude of physical processes and systems. During the past three decades, as a non-conventional approach to computational fluid dynamics (CFD), it has been rapidly developed to solve various flow problems. Recently, one of the hot topics is the application of LB method in modeling key physical processes occurring in energy conversion systems (such as solid oxide fuel cells (SOFCs), polymer electrolyte fuel cells (PEFCs), and microcombustors, etc.). In these systems, the fluid is usually a multispecies gaseous mixture flowing through complex geometries. The flow is governed by mass, momentum and energy transfer simultaneously, and is subject to chemical reactions. Comparing with traditional CFD methods which are difficult in describing the flows with finite Knudsen number and the flows in complex geometries, the advantages of LB method on these issues has been clearly revealed by many previous studies. Even though, LB method has become a more and more versatile numerical method for simulating a wide range of flow problems, the studies regarding the multicomponent mixture flows with heat transfer, which are the typical physical processes in the energy conversion systems, are still ongoing.

In this Thesis, numerical models were developed by using LB method based on standard lattices with small velocity set (two dimensional square lattice with nine discrete velocities (D2Q9) and three dimensional cubic lattice with twenty-seven discrete velocities (D3Q27)) for studying the energy conversion systems. The main work includes two parts. In the first part, a 3D LB numerical solver for the simulation of flows in complex geometries was implemented, validated and was used to calculate the transport properties of gas diffusion layers (GDLs) in polymer electrolyte fuel cells (PEFCs). By combining the LB fluid dynamic method with the X-ray tomographic microscopy (XTM) technique, the saturation dependent transport properties of GDLs were for the first time experimentally determined for the PEFCs under real working condition with electrochemically produced water. The proposal of the power law which correlates the saturation and the transport properties of the GDLs provided the experimental validation to the empirical studies and theoretical predictions presented in the literature.

In the second part, a novel LB model for catalytic reactive thermal multicomponent flows based on standard lattices was developed. The new model was constructed in a consistent way such that its properties are a combination of the advantages of previously proposed single-component thermal model [1] and isothermal multicomponent model [2]. At the first stage, the new model was established for thermal binary-mixture flows, which was thereafter

further extended for thermal multicomponent flows. At last, the complete reactive thermal multicomponent model was developed, validated and was applied to study catalytic reactive flows with large temperature variations. In order to study the thermal catalytic reactive flow problems, the diffusive boundary condition [3] was adapted to include the thermal surface reaction mechanism.

The macroscopic limits of the new proposed thermal multicomponent model include the complete governing equations, as required to correctly describe the physical processes in the thermal mixture flows. The model can simulate the mixture flows characterized by large temperature gradients, large density gradients and concentration gradients. Furthermore, the physical properties of the species (viscosity, mass diffusivity and heat conductivity) can be defined flexibly. Therefore, the proposed model is suitable for simulations of practical engineering flow problems, such as those encountered in combustion applications.

The model was validated with different thermal mixture flow problems. LB numerical results were presented and were compared with the theoretical solutions and predictions by using other numerical solvers. The model was further applied to simulate the catalytic reactive flows with large temperature variations, which shows for the first time the thermal catalytic reactive flows is successfully simulated with pure LB method. Simulation results were presented and compared with the predictions by using finite-volume method.

Zusammenfassung

Die Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) ist eine junge Berechnungsmethode zur Simulation diverser physikalischer Prozesse und Systeme. In den vergangenen drei Jahrzehnten wurde sie stetig als ein unkonventioneller Ansatz zur numerischen Strömungssimulation (computational fluid dynamics, CFD) weiterentwickelt, um verschiedene Strömungsprobleme zu lösen. Einer der Schwerpunkte in jüngster Zeit ist die Anwendung der LBM bei der Modellierung wesentlicher physikalischer Prozesse in Energieumwandlungssystemen, wie z.B. Festoxid-Brennstoffzellen (SOFC), Polymerelektrolytbrennstoffzellen (PEFC) und Mikrobrennern. In solchen Systemen ist das zu berechnende Fluid meist ein gasförmiges Gemisch verschiedener Spezies, welches durch eine komplexe Geometrie fließt. Diese Strömung wird durch Massen-, Impuls- und Energieerhaltung bestimmt, zudem finden chemischen Reaktionen statt. Mit herkömmlichen CFD-Ansätzen sind solche Strömungen mit endlicher Knudsen-Zahl und in komplexen Geometrien meist nur schwer zu lösen, während die LBM in diesen Fällen einige Vorteile hat, die in diversen früheren Studien diskutiert worden sind. Obwohl die LBM mittlerweile eine sehr vielseitige numerische Methode geworden ist, die sich für die Simulation vieler verschiedener Strömungsprobleme eignet, ist ihre Weiterentwicklung für die Berechnung von Mehrkomponentenströmungen mit Wärmetransfer, welche typisch für physikalische Prozesse in Energieumwandlungssystemen sind, immer noch Gegenstand weiterer Forschung.

In dieser Arbeit wurden numerische Modelle zur Simulation von Strömungen in Energieumwandlungssystemen entwickelt, welches die LBM basierend auf einem Standardgitter mit kleinen Geschwindigkeiten verwendet (zweidimensionale quadratische Gitter mit neun Einzelgeschwindigkeiten (D2Q9) und dreidimensionale kubische Gitter mit 27 Einzelgeschwindigkeiten (D3Q27)). Der Schwerpunkt dieser Arbeit umfasst zwei Teile. Im ersten Teil wurde ein numerischer 3D LBM Löser für die Strömungssimulation in komplexen Geometrien entwickelt, validiert und anschliessend dazu genutzt, die Transporteigenschaften von Gasdiffusionsschichten in Polymerelektrolytbrennstoffzellen zu berechnen. Indem die LBM mit Röntgenmikrotomographie (XTM) kombiniert wurde, konnte zum ersten Mal die sättigungsabhängigen Transporteigenschaften der Gasdiffusionsschicht einer PEFC unter Operationsbedingungen mit elektrochemisch produziertem Wasser experimentell untersucht werden. Der Vorschlag eines Potenzgesetzes, welches die Sättigung und die Transporteigenschaften der Gasdiffusionsschicht in ein Verhältnis setzt, hat die experimentelle Validierung verschiedener empirischer Studien und theoretischer Vorhersagen in der Literatur ermöglicht.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wurde ein neuartiges LBM Modell für katalytisch reaktive, thermische Mehrkomponentenströmungen basierend auf Standardgittern entwickelt. Dieses neue

Modell wurde so konstruiert, dass seine Eigenschaften die Vorteile von bereits vorgestellten thermischen Einkomponentenmodellen [1] und isothermischen Mehrkomponentenmodellen [2] vereinen. Zuerst wurde das Modell für thermische Zweikomponentenströmungen eingeführt und danach auf thermische Mehrkomponentenströmungen erweitert. Abschliessend wurde ein vollständiges reaktives, thermisches Mehrkomponentenmodell entwickelt, validiert und zur Untersuchung von katalytisch reaktiven Strömungen mit grossen Temperaturunterschieden verwendet. Um thermische, katalytisch reaktive Strömungen zu untersuchen, wurde eine diffusive Randbedingung [3] verwendet, um den thermischen Oberflächenreaktionsmechanismus einzufügen.

Die makroskopischen Grenzen des neuen thermischen Mehrkomponentenmodells enthalten die gesamten Erhaltungsgleichungen, wie sie benötigt werden, um die physikalischen Prozesse in der Strömung korrekt wiederzugeben. Das Modell ist in der Lage, Strömungen mit grossen Temperatur-, Dichte- und Konzentrationsgradienten zu simulieren. Des Weiteren können die physikalischen Eigenschaften der verschiedenen Spezies (Viskosität, Massendiffusion und Wärmeleitung) flexibel definiert werden. Daher ist das Modell für die Simulation realer Strömungsprobleme, wie sie in Verbrennungsanwendungen vorkommen, geeignet.

Das Modell wurde mit verschiedenen thermischen Strömungsproblemen validiert. Die Ergebnisse der LBM werden in dieser Arbeit vorgestellt und mit theoretischen Lösungen und den Ergebnissen anderer numerischer Löser verglichen. Das Modell wurde ausserdem zur Simulation von katalytisch reaktiven Strömungen mit grossen Temperaturänderungen verwendet, wodurch zum ersten Mal solche Strömungen alleine mit Hilfe der LBM erfolgreich simuliert wurden. Die Simulationsergebnisse werden vorgestellt und mit Ergebnissen, welche mittels einer Finite-Volumen-Methode berechnet wurden, verglichen.